

草酸钴合成过程批次间自适应优化

黄碧璇¹, 毛志忠^{1,2†}, 贾润达^{1,2}

(1. 东北大学 信息科学与工程学院, 辽宁 沈阳 110819;

2. 东北大学 流程工业综合自动化国家重点实验室, 辽宁 沈阳 110819)

摘要: 本文以钴湿法冶金过程草酸钴合成为背景, 研究基于多向偏最小二乘回归(MPLS)模型的草酸钴平均粒度批次间自适应优化策略. 本文首先利用MPLS方法建立草酸钴平均粒度的数据模型; 针对模型不确定性情况下难以获得最优操作变量的问题, 提出利用批次间修正项自适应优化方法, 使迭代优化结果逐渐趋向于实际最优值; 本文还通过引入 T^2 统计量软约束将优化结果限制在数据模型的有效区间之内. 数值仿真表明该方法可以有效解决草酸钴合成过程的批次间自适应优化问题, 且与传统两步方法和迭代学习控制相比具有更好的优化效果.

关键词: 草酸钴合成过程; 数据模型; 自适应修正项; 批次间优化; 模型不确定性

中图分类号: TP301.6 文献标识码: A

A batch-to-batch adaptive optimization for the cobalt oxalate synthesis process

HUANG Bi-xuan¹, MAO Zhi-zhong^{1,2†}, JIA Run-da^{1,2}

(1. College of Information Science and Engineering, Northeastern University, Shenyang Liaoning 110819, China;

2. State Key Laboratory of Synthetical Automation for Process Industries, Northeastern University, Shenyang Liaoning 110819, China)

Abstract: This paper takes the background of cobalt oxalate synthesis in cobalt hydrometallurgy process, and an adaptation optimization strategy for mean particle size of cobalt oxalate based on multi-way partial least squares (MPLS) model is studied. Firstly, the MPLS algorithm is used to build the data model of mean particle size of cobalt oxalate. In order to overcome the problem that it is difficult to obtain the optimal manipulated variables under model uncertainty, a modifier-adaptation strategy based batch-to-batch optimization method is proposed to make the iteration results converge to the practical optimal operating point. Additionally, T^2 statistic soft constraint is used to confine the optimal solution in the valid region of the data-driven model. The simulation results show that the proposed method can efficiently solve the batch-to-batch adaptation optimization problem for cobalt oxalate synthesis process, and better optimization results can be achieved compared with traditional two-step approach and iterative learning control (ILC).

Key words: cobalt oxalate synthesis process; data models; modifier-adaptation; batch-to-batch optimization; model uncertainty

1 引言(Introduction)

随着金属钴在硬质合金领域和电池行业的广泛应用, 钴粉的质量及生产成本受到了高度重视. 而草酸钴作为金属钴生产过程的重要中间产物, 其质量直接影响到金属钴粉的平均粒度, 并且草酸钴平均粒径太小会造成滤网阻塞、干燥时间减缓、生产效率低下等问题. 因此, 通过草酸钴平均粒度优化提高生产效率具有重要现实意义.

目前, 颗粒粒度在线测量主要采用聚焦反射仪, 但其应用成本和维护费用较高, 一般企业很难配置^[1],

因此最直接的替代方法是用机理模型预测产品粒度^[2-5]. 但由于结晶过程机理复杂, 难以得到准确的数学模型, 导致基于该模型的优化结果在实际中往往不是最优解. 为解决该问题, Chachuat提出了利用实际测量值修正目标函数和约束条件^[6], 使优化结果最终收敛到真实最优值; 另一种综合系统优化和参数估计方法(ISOPE)是通过在目标函数中加入梯度的修正项使优化结果满足最优解必要条件(NCO)^[7]. Marchetti^[8-9]结合以上两种思路提出了一种更加通用的自适应修正方法, 使迭代优化结果收敛于最优解, 但以上

收稿日期: 2015-02-17; 录用日期: 2015-08-21.

†通信作者. E-mail: maozhizhong@ise.neu.edu.cn; Tel.: +86 24-83687434.

本文责任编辑: 阳春华.

国家自然科学基金项目(61473072, 61203103)资助.

Supported by National Natural Science Foundation of China(61473072, 61203103).

方法都是基于机理模型进行的,使算法对实际过程中不确定因素的适应性降低,且建模过程须消耗大量时间和资源。

而草酸钴合成过程属于间歇过程,有大量可利用的历史数据,因此建立基于数据的统计模型成为了一种新的研究思路^[10]。Francis等人利用粒数平衡方程结合偏最小二乘回归对乳浊液粒度分布进行建模^[11];常玉清等^[12]建立了结合最小二乘支持向量机与草酸钴机理模型的混合模型,并利用自适应遗传算法对草酸钴粒度分布进行了控制,但混合模型仍需要大量实验进行机理参数辨识,使应用成本提高。为更好的提高算法的动态性能,Zhang等人提出了迭代学习与数据模型相结合的控制方法^[13],而为保证数据模型的有效性;Flores-Cerrillo等人提出了实时更新数据模型的,并利用更新后的模型进行优化的两步优化方法^[14],但以上两种方法并不能保证解的最优性。因此,合成过程粒度优化目前仍存在机理建模难度大、推广性差,基于数据的迭代优化算法难以保证结果最优的问题。

为降低建模复杂程度并改善算法在模型具有不确定性时的寻优结果,本文提出基于MPLS模型的自适应优化算法对草酸钴粒度进行优化。利用MPLS建立数据模型,结合修正项自适应算法使优化结果收敛于最优解;最后,在目标函数中加入软约束,控制模型泛化带来的误差。

2 草酸钴合成过程模型(Model of cobalt oxalate synthesis process)

2.1 草酸钴合成过程描述及机理模型(Description and mechanism model of cobalt oxalate synthesis process)

本文需要利用草酸钴合成过程机理模型代替实际生产过程,为数据模型提供合理的建模数据,同时在仿真过程时利用机理模型代替实际生产,因此需要对草酸钴生产过程进行机理分析并建立机理模型。草酸钴生产主要工艺如图1所示,其核心反应方程式为

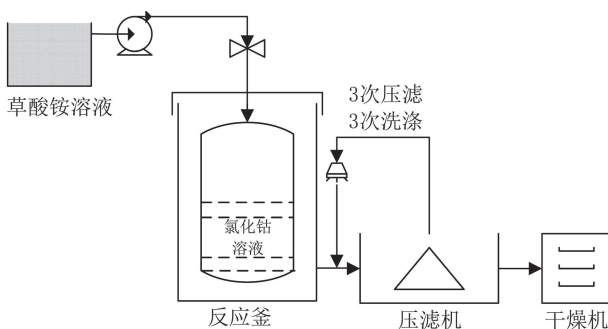
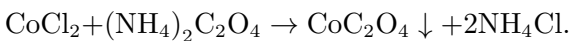


图1 草酸钴合成过程

Fig. 1 Synthetic process of cobalt oxalate

在实际生产时,反应釜中通入固定浓度和体积的

氯化钴溶液,用蒸汽加热到反应适宜温度后,以一定速率通入草酸铵溶液,持续通入11 min后反应结束,可得草酸铵的悬浊液,将悬浊液通入压滤机中进行3次压滤、3次洗涤,最后干燥即得成品草酸钴。溶液浓度可在反应开始前测得,反应温度利用PI控制器使其保持在恒定值,且反应釜的搅拌速率一般也为恒定。因此可以影响草酸钴粒度的操作变量只有草酸铵溶液的添加速度,生产指标为草酸钴的平均粒度,可在每一批次反应结束后离线测得。

草酸钴合成的动态模型一般可用粒数平衡方程与物料平衡方程联立求得。假设合成釜容积固定,悬浊液搅拌充分,各处浓度均一,成核大小为无限小,晶体生长速度与晶体大小无关,并忽略凝并和破碎影响^[4]。分批结晶过程的粒数平衡模型可表示为

$$\frac{\partial n(t, L)}{\partial t} = -G \frac{\partial n(t, L)}{\partial L} - \frac{F_B}{V} n(t, L). \quad (1)$$

初始条件和边界条件为

$$n(0, L) = n_0(L) \approx 0, \quad (2)$$

$$n(t, 0) = \frac{B}{G}, \quad (3)$$

其中: n 表示 t 时刻的粒数密度函数, L 代表特征粒径, V 是悬浊液体积, F_B 是草酸铵注入速率, B 和 G 分别是成核速率和生长速率。可以看出式(1)是一个复杂的双曲偏微分方程,一般不存在解析解,因此可以通过矩量分析方法^[3],将其变为一组矩的常微分方程。粒度分布函数的 k 阶矩定义为

$$\mu_k = \int_0^\infty L^k n(t, L) dL. \quad (4)$$

结合式(1)–(4)可得

$$\frac{d\mu_k}{dt} = kG\mu_{k-1} + Bn_0^k - \frac{F_B\mu_k}{V}. \quad (5)$$

B 和 G 的经验公式为

$$\begin{aligned} B &= k_b e^{-K_b/T} N^\gamma (\Delta C)^\alpha, \\ G &= k_g e^{-K_g/T} (\Delta C)^\beta, \end{aligned} \quad (6)$$

其中: k_b 和 k_g 是成核速率系数和生长速率系数, K_b 和 K_g 是温度经验常数, N 是搅拌速率, α 是成核速率指数, γ 是生长速率指数; β 是过饱和度, $\Delta C = C - C_s$ 为溶液浓度与溶解度之差。由物料守恒定律可得溶液浓度:

$$\frac{dC}{dt} = \frac{F_B C_B V_{A0}}{(V_{A0} + F_B t)^2} - \rho_p k_V 3G\mu_2 - \frac{F_B C}{V}. \quad (7)$$

其中: ρ_p 是晶体密度, V_{A0} 是初始氯化钴体积, k_V 是体积形状因子。

由零阶矩和一阶矩可求出平均粒径为

$$y = \frac{\mu_1}{\mu_0} = \frac{\int_0^\infty L n(t, L) dL}{\int_0^\infty n(t, L) dL}. \quad (8)$$

本文中选用的机理模型参数如表1所示^[15].

表1 机理模型参数

参数	数值	参数	数值
$k_b/(m^{-3} \times s^{-1})$	8.3×10^{11}	$k_g/(m \times s^{-1})$	2.8×10^{14}
K_b/K	1.36×10^4	K_g/K	1.58×10^4
γ	2.13	β	1
α	2.78	k_V	0.74

2.2 草酸钴合成过程MLPS模型(MPLS model of cobalt oxalate synthesis process)

考虑到机理建模的难度和草酸钴的生产特点, 本文采用数据模型对草酸钴生产过程建模. 且由于操作变量分段后维数较多, 存在共线性问题, 本文采用MPLS模型来解决以上问题^[16-18]. 为获得原始建模数据, 须在历史生产数据中选取适当的操作变量数据和相应的产品质量作为建模的原始数据. 假设可以控制的操作变量个数为 J , 并且在一个批次内将其分为 K 段进行调整, 在每个分段内操作变量保持恒定, 共选取 I 个批次, 可以组成如图2所示的三维输入变量 $U(I \times J \times K)$.

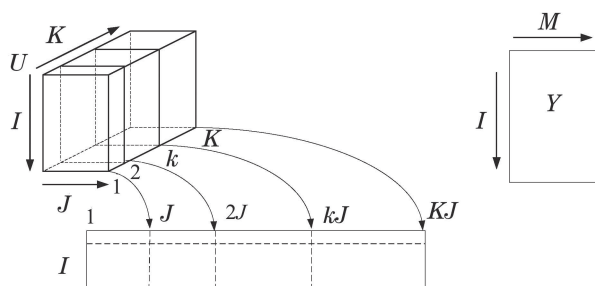


图2 基于批次的三维数据展开示意图

Fig. 2 Unfolding diagram of 3-D data based on batch

将三维数据 U 展开为二维, 本文通过按批次展开的方式将 U 变为 $I \times KJ$ 维数据, 具体方式如图2所示. $Y(I \times M)$ 是输出矩阵, M 代表与产品质量相关的测量值个数. 本文中 $Y(I \times 1)$ 为草酸钴平均粒径矩阵, $U(I \times 1 \cdot K)$ 为草酸铵溶液流量的控制轨迹矩阵. 在得到原始数据后首先要对其进行标准化处理, 使输出矩阵和输入矩阵的每一列均值为0, 方差为1. 对标准化后的数据进行偏最小二乘回归, 得到多向偏最小二乘回归(MPLS)统计模型具体形式如下所示:

$$\begin{cases} \tilde{U} = TP^T + E, \\ \tilde{Y} = TQ^T + F, \\ T = \tilde{U}W, \end{cases} \quad (9)$$

$$\hat{Y} = \tilde{u}WQ^T = \tilde{u}B. \quad (10)$$

其中: P, Q 是负载矩阵, E, F 为残差矩阵, 得分矩阵 T 是操作变量的线性组合, \hat{Y} 是标准化后的预测值,

“ \sim ”代表标准化后的数据. 预测时将一个批次的操作变量轨迹进行标准化处理得 \tilde{u} , 带入式(10)得到标准化后的预测值, 去标准化得预测值 $\hat{Y} = \tilde{Y}S_Y + \bar{Y}$. 虽然非线性模型在对实际过程的描述上更加细致, 但在PLS算法数据标准化过程可以减小非线性对预测结果的影响, 而且修正项自适应优化方法可以对模型偏差进行修正. 同时PLS作为线性模型也具有一定优势, 首先如果数据模型精度下降严重, 线性模型可以用递推算法进行更新, 减少计算量, 而非线性模型则需要重新建模, 其次采用线性模型可以使模型始终为凸优化问题, 使求解过程复杂度降低.

3 考虑模型偏差的批次间优化方法 (Batch-to-batch optimization considering model mismatch)

3.1 草酸钴粒度优化模型(Optimization of cobalt oxalate particle size)

在草酸钴生产过程中, 平均粒径是一个重要的生产指标, 它直接影响生产效率及产品质量, 较大的平均粒径有利于后续过滤、干燥等过程的进行, 因此本文通过批次间自适应优化方法来提高草酸钴平均粒径. 假设实际过程模型可以抽象为 $y = f_p(\mathbf{u})$, 其中: \mathbf{u} 为一个批次内的操作变量轨迹, y 是草酸钴平均粒径. 该优化问题可归纳为如下形式:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_p^* &:= \arg \max_{\mathbf{u}} \phi_p(\mathbf{u}) = y, \\ \text{s.t. } &u_{\min} \leq u_i \leq u_{\max}, \quad i = 1, 2, \dots, \\ &M_{\min} \leq M \leq M_{\max}, \end{aligned} \quad (11)$$

其中: $M = \mathbf{u} \cdot \mathbf{t}$ (\mathbf{t} 是一个批次的反应时间), \mathbf{u}_p^* 是操作变量轨迹的最优解, $\phi_p(\mathbf{u})$ 是目标函数; $[u_{\min}, u_{\max}]$ 是操作变量的取值范围, $[M_{\min}, M_{\max}]$ 是反应物质量的取值范围, 下标 p 代表实际过程模型.

但实际建模时由于存在过程干扰、测量仪器误差、实验成本限制和数学模型化简等诸多因素, 导致模型输出与实际过程的偏差无法消除, 即生产过程的精确模型 $y = f_p(\mathbf{u})$ 无法获得. 如果用近似数学模型代替真实过程, 假设数学模型为 $y = f(\mathbf{u})$ 其优化问题抽象化为:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}^* &:= \arg \max_{\mathbf{u}} f(\mathbf{u}), \\ \text{s.t. } &u_{\min} \leq u_i \leq u_{\max}, \quad i = 1, 2, \dots, \\ &M_{\min} \leq M \leq M_{\max}. \end{aligned} \quad (12)$$

当模型 $y = f(\mathbf{u})$ 与实际过程 $y = f_p(\mathbf{u})$ 完全一致时, 解决以上的优化问题既可以得到最优操作变量轨迹, 但由于模型的不确定性, 优化结果 \mathbf{u}^* 对实际过程而言可能只是一个次优解, 更严重的情况可能已经超出安全范围. 因此本文提出用修正项自适应的方法, 在生

产批次间对优化模型进行修正,以得到真实的最优值.

3.2 基于自适应修正项的批次间优化(Batch-to-batch optimization based on modifier-adaptation)

修正项自适应优化方法是一种考虑模型不确定性的优化算法.通过实际测量值与预测值的偏差及其导数的偏差,不断迭代的修正目标函数和约束条件,使 \mathbf{u}^* 不断逼近实际最优解 \mathbf{u}_p^* ,最终求得实际过程的最优操作轨线.可以证明,迭代过程的收敛点处KKT条件与实际最优解的KKT条件相等^[9].根据改进算法,将式(12)的优化方程改写为式(13)的迭代优化形式,在第 $k+1$ 次优化前,测量第 k 批次的实际生产结果和模型预测输出,然后按照式(13)的方式对目标函数进行修正,求解修正后的优化模型得到下一批次的操作变量轨迹 \mathbf{u}_{k+1}^* .

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_{k+1}^* &:= \arg \max_{\mathbf{u}} f(\mathbf{u}) + \varepsilon_k^\phi + \lambda_k^\phi (\mathbf{u} - \mathbf{u}_k), \\ \text{s.t. } u_{\min} &\leq u_i \leq u_{\max}, i = 1, 2, \dots, \\ M_{\min} &\leq M \leq M_{\max}, \end{aligned} \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \varepsilon_k^\phi &:= f_p(\mathbf{u}_k) - f(\mathbf{u}_k), \\ \lambda_k^\phi &:= \nabla f_p(\mathbf{u}_k) - \nabla f(\mathbf{u}_k), \end{aligned} \quad (14)$$

其中: ε_k^ϕ 是实际生产结果与模型预测结果之差; λ_k^ϕ 是实际目标函数与模型目标函数在 \mathbf{u}_k 处梯度之差.

修正项自适应优化方法的关键在于对式(14)中未知的实际目标函数梯度 $\nabla f_p(\mathbf{u}_k)$ 的估计,估计的精度将影响优化过程的收敛效果,目前一些学者已经提出了一系列关于梯度估计的方法,如有限项差分法、动态模型辨识法、Broyden法等^[19].其中Broyden梯度估计法是利用每一次的测量值对被控对象梯度进行更新,具有较强的实时性,可以对扰动进行很好的抑制,本文采用该方法进行梯度估计,其表达形式为

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_p(\mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}} \Big|_{\mathbf{u}_k} &= \\ \frac{\partial F_p(\mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}} \Big|_{\mathbf{u}_{k-1}} &+ \\ \frac{(\Delta F_p(\mathbf{u}_k) - \frac{\partial F_p(\mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}} \Big|_{\mathbf{u}_{k-1}} \Delta \mathbf{u}_k)(\Delta \mathbf{u}_k)^T}{(\Delta \mathbf{u}_k)^T \Delta \mathbf{u}_k}, \end{aligned} \quad (15)$$

其中: \mathbf{u}_k 是第 k 批次输入量, $F_p(\mathbf{u})$ 是被估计梯度的函数,

$$\begin{aligned} \Delta \mathbf{u}_k &= \mathbf{u}_k - \mathbf{u}_{k-1}, \\ \Delta F_p(\mathbf{u}_k) &= F_p(\mathbf{u}_k) - F_p(\mathbf{u}_{k-1}), \end{aligned}$$

本文中 F_p 是目标函数, $\frac{\partial F_p(\mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}} \Big|_{\mathbf{u}_k}$ 是第 k 批次的梯度估计值.将上述估计值带入式(13)中,可得到第 $k+1$ 次的优化结果.

但是如果直接将优化结果 $\mathbf{K}\mathbf{u}_{k+1}^*$ 作为下一次的

操作变量轨迹,容易造成结果对噪声过于敏感,为了防止噪声等因素引起优化模型的过度修正,需要对优化所得结果进行滤波,本文采用一阶滤波方程如下

$$\mathbf{u}_{k+1} = (\mathbf{I} - \mathbf{K})\mathbf{u}_k + \mathbf{K}\mathbf{u}_{k+1}^*, \quad (16)$$

其中: \mathbf{K} 为滤波增益矩阵,其对角线上为增益系数 k_i ($0 < k_i < 1$),其他元素为零; \mathbf{u}_{k+1} 为实际作用于过程的操作变量轨迹.最终,优化整体流程如图3所示.

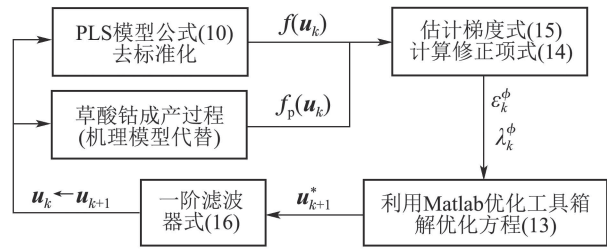


图3 修正项自适应优化算法

Fig. 3 Modifier-adaptation optimization

3.3 模型有效性约束(Model validity constraint)

在实际应用时,数据模型在距原始数据一定距离的范围内具有较高的预测精度,一旦操作变量远离建模数据,预测精度将会大幅下降,这时称模型出现了外推,即模型泛化带来的误差已经超出合理范围.偏最小二乘回归建模时,可采用 T^2 统计量判断数据的有效性,即判断该数据是否远离其他建模数据,当某一数据的 T^2 统计量大于95%置信区间时即认为发生外推.利用 T^2 统计量的这一特点,Flore Cerrillo^[20]等在解决数据模型优化问题时,将 T^2 统计量引入到目标函数中作为一项软约束,防止模型外推;而Lauri将 T^2 统计量作为硬约束,加入优化方程^[21],两种方法都可以提高模型的预测精度.本文中将 T^2 统计量软约束加入到修正后的目标函数上,目标函数变为:

$$\max_{\mathbf{u}} \phi(\mathbf{u}) + \varepsilon_k^\phi + \lambda_k^\phi (\mathbf{u} - \mathbf{u}_k) - g_1 \cdot T^2(\mathbf{u}), \quad (17)$$

$$T^2(\mathbf{u}) = \sum_{a=1}^A \frac{t_a^2}{s_a^2}, \quad (18)$$

$$\mathbf{T} = \tilde{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{W}, \quad (19)$$

其中: s_a^2 是矩阵 \mathbf{T} 在第 a 列的方差, t_a^2 是 \mathbf{T} 矩阵的第 \mathbf{T} 个元素, A 代表 \mathbf{T} 矩阵的列数, g_1 是权重系数($g_1 > 0$),当 g_1 变大时外推的可能性降低, g_1 变小时外推的可能性增大.

4 仿真研究(Simulation)

本文以湿法冶金草酸钴合成过程为背景,对草酸钴平均粒度进行优化,操作变量为草酸铵流量,每一批次中,将草酸铵流量分11段进行调整,批次内可以实时检测草酸铵流量,每一批次反应结束可离线测量草酸钴平均粒度,设定草酸钴每批生产时间为11 min,反应温度恒定为 25° ,搅拌速率为0.7 r/s.为验证本文

方法的有效性, 利用机理模型代替实际反应过程, 生产50个批次可得数据模型建模所需操作变量(草酸铵流量)矩阵 $X(50 \times 11)$, 而输出矩阵为草酸钴平均粒径 $Y(50 \times 1)$, 根据以上数据即可建立草酸钴平均粒度的数据模型. 利用20组数据对数据模型进行测试.

所得结果如图4所示, 当温度存在3%和5%的偏差时数据模型可以有效地反应出平均粒度的变化规律, 经计算当参数变化时, 模型预测值的相对均方根误差(RMSE)见表2.

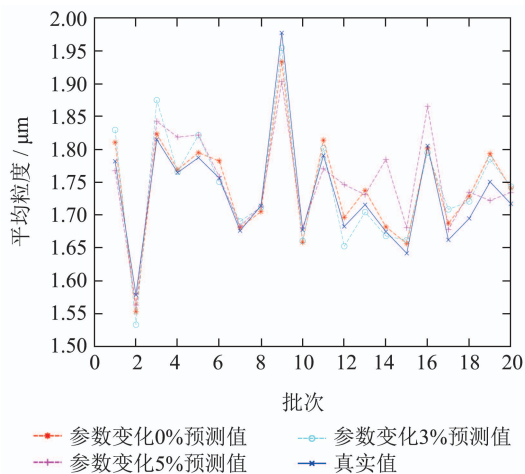


图 4 数据模型估计结果

Fig. 4 Prediction results of data based model

表 2 模型预测结果误差

Table 2 Prediction result error of MPLS model

参数变化	0%	3%	5%
RMSE	1.3%	1.6%	2.4%

在建立模型之后, 根据实际生产要求, 设计如下约束条件:

$$\begin{cases} 0.0005 \leq u_i \leq 0.004, & i = 1, 2, \dots, 11, \\ 1500 \leq M \leq 1700, \end{cases} \quad (20)$$

其中: u 是草酸铵流量, 单位为 m^3/s , M 是添加草酸铵的量, 单位为 mol .

为验证修正项自适应算法能在迭代多次后趋向于最优解, 本文将修正性自适应优化方法与两步优化方法^[14]以及迭代学习控制^[13](ILC)方法进行对比, 仿真结果如图5所示. 可以看出, 两步优化的最优值远小于真实的最优值, 迭代学习控制方法虽然使优化效果得到改善, 但仍不能保证优化趋向最优解, 而采用修正项自适应的迭代优化之后, 由于每一批次都利用实际生产数据对优化方程进行修正, 经过数代最终平均粒度收敛到了实际最优值附近.

同时由图6可以得出, 操作变量轨迹在优化过程中也是逐渐收敛的.

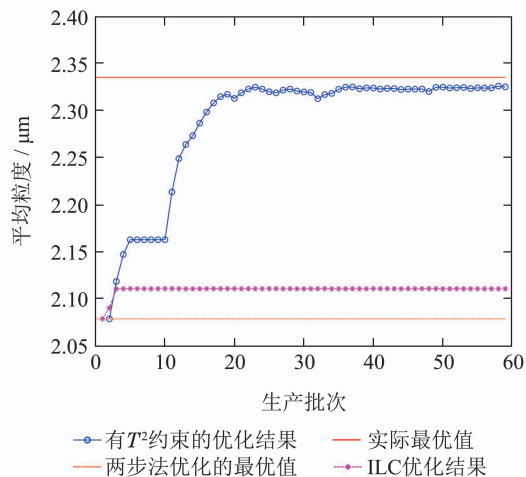


图 5 自适应优化与两步法和ILC的优化对比

Fig. 5 Compare results of adaptation optimization and ILC optimization

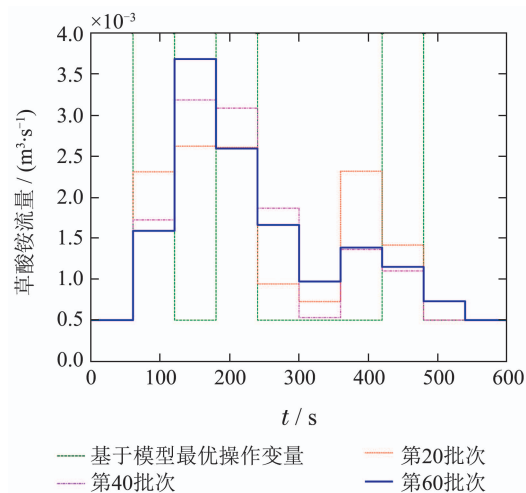


图 6 操作变量轨迹优化结果

Fig. 6 Optimization results of operating-trajectory

为了验证软约束对模型寻优的影响, 在去掉软约束的情况下对草酸钴平均粒度进行优化, 由图7可以观察到去掉 T^2 约束后迭代优化的前半段, 上升的速率明显低于有 T^2 约束的优化, 这是由于模型外推的得到的结果在实际过程中并不适用造成的, 即模型的优化值在实际中表现出次优的特性.

另外由图8还可以观察到, 优化结果收敛到了一个次优值, 这也是模型外推造成的. 因此在优化模型中加入软约束提高了优化的效率和精度.

最后, 为验证扰动对优化结果的影响, 本文假设每以批次反应物浓度在相对标准浓度都有不同程度的偏差, 将反应物浓度扰动加入到仿真中, 并对两步法和自适应修正法进行仿真, 由图9可以看出, 虽然自适应优化方法在扰动的干扰下算法在收敛后仍会产生一些波动, 但依然可以不断向真实最优值处收敛, 同时与两步法相比, 自适应修正算法的波动更小, 效果明显强于两步法.

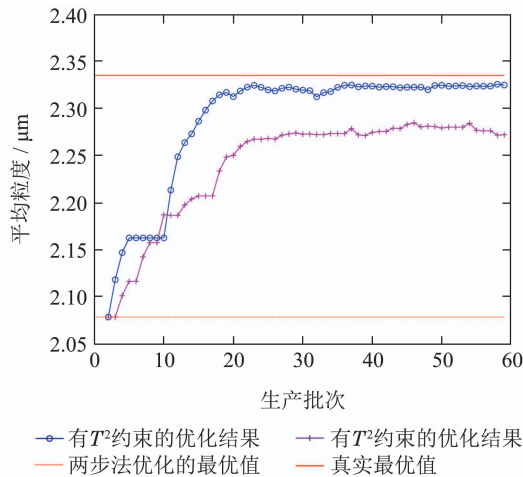


图7 模型有效性约束仿真

Fig. 7 Simulation of model validity constraint

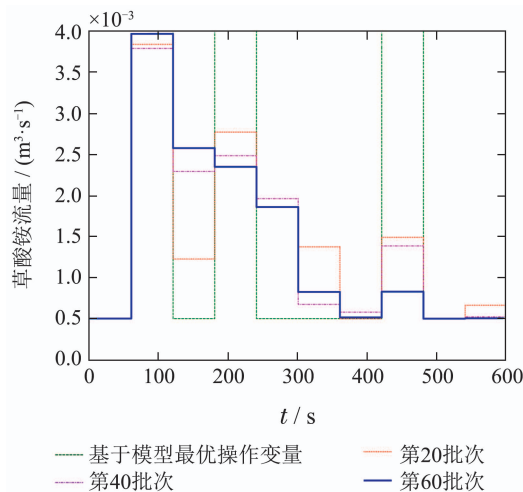


图8 无有效性约束的操作变量轨迹优化结果

Fig. 8 Optimization results of operating-trajectory without validity constraint

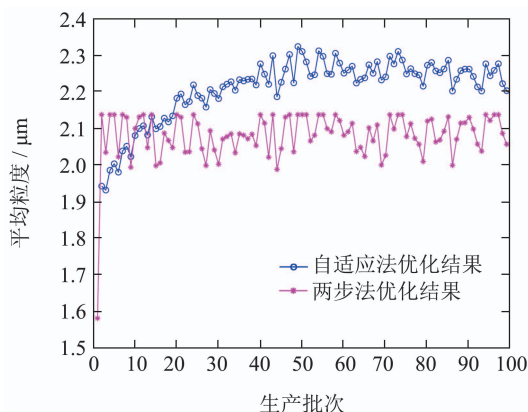


图9 存在扰动时的优化结果

Fig. 9 Optimization results with disturbances

5 结论(Conclusion)

针对草酸钴粒度优化中,在线测量成本较高,机理建模耗费人力物力等问题,本文提出了一种基于MPLS的批次间自适应优化策略.利用间歇过程丰富

的历史数据,建立了MPLS模型;并考虑到数学模型不能完全匹配真实过程,且基于数学模型的优化结果可能得到次优解或超出适用范围的问题,提出了自适应修正项的优化方法对草酸钴平均粒度进行优化,使迭代优化的结果逐渐趋向最优解;并且,考虑到数据模型外推会影响预测精度,构造了 T^2 统计量软约束,提高模型预测准确性,改善了优化效果.最终通过仿真证明了该方法与传统方法相比可以取得更接近实际最优值的优化结果,并且具有较快的收敛速度、精度及更好的可移植性.

参考文献(References):

- [1] DONG W. *Modeling and optimization of cobalt oxalate particle size distributions based on KPLS hybrid model* [D]. Shenyang: Northeastern University, 2009.
- [2] PAENGJUNTUEK W, KITTISUPAKORN P, ARPORNWICHANOP A. Batch-to-batch optimization of batch crystallization processes [J]. *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 2008, 16(1): 26 – 29.
- [3] SHI D, EL-FARRA N, LI M. Predictive control of particle size distribution in particulate processes [J]. *Chemical Engineering Science*, 2006, 61(1): 268 – 281.
- [4] MESBAH A, LANDLUST J, HUESMAN A. A model-based control framework for industrial batch crystallization processes [J]. *Chemical Engineering Research and Design*, 2010, 88(9): 1223 – 1233.
- [5] ZHANG S, WANG F, HE D, et al. Batch-to-batch control of particle size distribution in cobalt oxalate synthesis process based on hybrid model [J]. *Powder Technology*, 2012, 224(7): 253 – 259.
- [6] CHACHUAT B, SRINIVASAN B, BONVIN D. Adaptation strategies for real-time optimization [J]. *Computers & Chemical Engineering*, 2009, 33(10): 1557 – 1567.
- [7] BRDYŚ M, TATJEWSKI P. *Iterative algorithms for multilayer optimizing control* [D]. London: Imperial College, 2005.
- [8] MARCHETTI A, CHACHUAT B, BONVIN D. A dual modifier-adaptation approach for real-time optimization [J]. *Journal of Process Control*, 2010, 20(9): 1027 – 1037.
- [9] MARCHETTI A, CHACHUAT B, BONVIN D. Modifier-adaptation methodology for real-time optimization [J]. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2009, 48(13): 6022 – 6033.
- [10] AUMI S, CORBETT B, CLARKE-PRINGLE T. Data-driven model predictive quality control of batch processes [J]. *AIChE Journal*, 2013, 59(8): 2852 – 2861.
- [11] DOYLE III F J, HARRISON C A, CROWLEY T J. Hybrid model-based approach to batch-to-batch control of particle size distribution in emulsion polymerization [J]. *Computers & Chemical Engineering*, 2003, 27(8/9): 1153 – 1163.
- [12] CHANG Yuqing, LIANG Qian, WANG Shu, et al. Modeling and optimization of cobalt oxalate particle size distribution in hydrometallurgy synthesis process [J]. *Journal of Northeastern University (Natural Science)*, 2012, 33(11): 1533 – 1537.
(常玉清, 梁倩, 王姝, 等. 湿法冶金草酸钴粒度分布建模与优化研究 [J]. 东北大学学报(自然科学版), 2012, 33(11): 1533 – 1537.)
- [13] ZHANG J, NGUYAN J, MORRIS J. Iterative learning control of a crystallisation process using batch wise updated linearised models identified using PLS [C] // *The 19th European symposium on computer aided process engineering*. New York: Elsevier, 2009, 26: 14 – 17.
- [14] FLORES-CERRILLO J, MACGREGOR J. Within-batch and batch-to-batch inferential-adaptive control of semibatch reactors: A partial

- least squares approach [J]. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2003, 42(14): 3334 – 3345.
- [15] ZHANG Shuning, WANG Fuli, YOU Fuqiang, et al. On the hybrid modeling method of cobalt oxalate grain size distribution in hydrometallurgy synthesis process [J]. *Journal of Northeastern University (Natural Science)*, 2010, 31(1): 8 – 11.
(张淑宁, 王福利, 尤富强, 等. 湿法冶金草酸钴粒度分布混合建模方法 [J]. 东北大学学报(自然科学版), 2010, 31(1): 8 – 11.)
- [16] NOMIKOS P, MACGREGOR J. Multi-way partial least squares in monitoring batch processes [J]. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 1995, 30(1): 97 – 108.
- [17] JIA Runda, MAO Zhizhong, CHANG Yuqing, et al. Nonlinear robust partial least squares based on projection pursuit and its application [J]. *Control Theory & Applications*, 2010, 27(3): 391 – 394, 399.
(贾润达, 毛志忠, 常玉清, 等. 基于投影寻踪的非线性鲁棒偏最小二乘法及应用 [J]. 控制理论与应用, 2010, 27(3): 391 – 394, 399.)
- [18] WANG Wei, CHAI Tianyou, ZHAO Lijie. Dynamic partial least squares modeling with recurrent neural networks of stable learning [J]. *Control Theory & Applications*, 2012, 29(3): 337 – 341.
(王魏, 柴天佑, 赵立杰. 带有稳定学习的递归神经网络动态偏最小二乘建模 [J]. 控制理论与应用, 2012, 29(3): 337 – 341.)
- [19] FRANÇOIS G, SRINIVASAN B, BONVIN D. Comparison of six implicit real-time optimization schemes [J]. *Journal Européen des Systèmes Automatisés*, 2012, 46(2/3): 291 – 305.
- [20] FLORES-CERRILLO J, MACGREGOR J. Control of batch product quality by trajectory manipulation using latent variable models [J]. *Journal of Process Control*, 2004, 14(5): 539 – 553.
- [21] LAURÍ D, SANCHIS J, MART NEZ M. Latent variable based model predictive control: Ensuring validity of predictions [J]. *Journal of Process Control*, 2013, 23(1): 12 – 22.

作者简介:

黄碧璇 (1990–), 女, 硕士研究生, 研究方向为复杂工业系统建模与优化, E-mail: xxhbx1990@foxmail.com;

毛志忠 (1961–), 男, 教授, 博士生导师, 研究方向为复杂工业系统建模、优化与控制, E-mail: maozhizhong@ise.neu.edu.cn;

贾润达 (1958–), 男, 讲师, 博士, 主要研究方向为复杂系统过程建模与软测量, E-mail: jiarunda@ise.neu.edu.cn.